

## Capítulo 6

### Resultados da Simulação de Sistemas Granulares Usando-se o Método de Elementos Distintos

#### 6.1 – Introdução

O programa computacional desenvolvido a partir da formulação do Método de Elementos Distintos exposta no capítulo anterior, por seu caráter genérico quanto às possíveis configurações de sistemas a serem estudados, abre espaço para uma vasta área de pesquisa. Através da escolha adequada dos dados de entrada, é possível, sem necessidade de qualquer alteração no código do programa, contemplar inúmeras possibilidades. Pode-se, por exemplo, variar os parâmetros de interação entre pares, permitindo o estudo da influência de tais parâmetros sobre o comportamento de sistemas granulares simulados, definir sistemas com qualquer distribuição de tamanhos e densidades das partículas, construir recipientes e artefatos com diversas dimensões e formatos (definidos como conjuntos de obstáculos) e, caso se queira, impor a eles movimentos periódicos, possibilitando a simulação de equipamentos utilizados em laboratório ou na indústria, realizar o preenchimento ou a descarga de equipamentos simulados, utilizar configurações obtidas em uma dada simulação como condição inicial para outras, etc.

Neste capítulo, apresentam-se e discutem-se alguns dos resultados obtidos com a aplicação do supracitado programa. Deve-se afirmar que o objetivo, aqui, não é realizar um estudo aprofundado sobre um ou outro aspecto do comportamento de materiais granulares ou simular a operação de um determinado equipamento industrial que envolva a sua manipulação, mas sim confirmar a potencialidade do Método de Elementos Discretos como instrumento para a simulação de tais sistemas e, neste contexto, demonstrar a validade e a versatilidade das ferramentas computacionais desenvolvidas na segunda parte desta tese. Com este intuito, opta-se por considerar exemplos variados. Primeiramente, estudam-se a formação de leitos monodispersos de

esferas por deposição aleatória em recipientes cilíndricos e a alteração na estrutura de tais leitos provocada por agitações mecânicas de baixa amplitude e alta freqüência. Após isto, investiga-se o Fenômeno Castanha-do-Pará, ou seja, a segregação que ocorre em misturas binárias de partículas de diferentes tamanhos quando submetidas a vibrações mecânicas. Em seguida, simula-se o escoamento de partículas durante o processo de descarga de equipamentos como silos e tremonhas, representados aqui por pequenos recipientes de formato cilíndrico. Por fim, ainda no contexto da descarga de equipamentos, busca-se transcrever resultados experimentais obtidos por Hunt *et al.* (1999) sobre o efeito de vibrações horizontais sobre os padrões de escoamento em recipientes com paredes planas e fundo inclinado.

Através dos referidos exemplos, espera-se esclarecer que o DEM, diferentemente dos métodos de Fluidodinâmica Computacional (CFD), que se baseiam na Teoria do *Continuum*, consiste em uma técnica cuja aplicação a sistemas granulares é natural, pois com ele se é capaz de abordar diferentes aspectos e, mesmo sem se valer de modelos sofisticados, detectar fenômenos característicos destes materiais, tais como os chamados efeitos cooperativos. No caso das técnicas de CFD, o tratamento de descontinuidades se torna intrincado devido à necessidade de se discretizar o espaço simulado para a solução das equações do movimento, o que inflige dificuldades ao estudo do escoamento ao redor de obstáculos com geometria complexa. Mediante os resultados expostos nesta seção, ver-se-á que o DEM não traz consigo este tipo de complicação. Por outro lado, o elevado esforço computacional intrínseco a ele restringe, ainda hoje, a sua aplicação a sistemas com quantidades moderadas de partículas (dezenas ou centenas de milhares, dependendo-se dos recursos computacionais disponíveis) e à avaliação de períodos de tempo relativamente curtos para sistemas com partículas de dimensões reduzidas (poucos segundos, para diâmetros na ordem de milímetros ou micrômetros). Entretanto, com os avanços tecnológicos da informática, tais dificuldades tendem a se tornar cada vez menos impeditivas.

A próxima seção se destina à determinação dos valores dos parâmetros a serem utilizados nas simulações com o DEM, referentes aos exemplos citados acima, os quais são tratados nas seções subsequentes.

## 6.2 – Determinação de Parâmetros

Se o objetivo de uma simulação com o DEM for a reprodução quantitativa do comportamento de um determinado sistema granular real, a escolha dos valores dos parâmetros deverá ser realizada cuidadosamente (Mishra e Murty, 2001). Entretanto, para os propósitos do presente trabalho, julga-se ser suficiente a adoção de valores coerentes, devidamente resgatados de trabalhos prévios de outros autores. Kuo *et al.* (2002), por exemplo, estudaram a influência de tais parâmetros sobre o comportamento de partículas granulares no interior de misturadores. No caso da rigidez de uma partícula, tais autores afirmam que não há uma base física para a escolha de seu valor. O que se costuma fazer, na prática, buscando-se economia de tempo computacional, é adotar valores considerados baixos (por permitirem inter penetrações mais profundas e colisões mais longas que entre partículas reais). Kuo *et al.* (2002) citam um estudo realizado por Yuu *et al.* (1995), no qual se verificou que o comportamento do sistema simulado não sofria fortes alterações para valores de rigidez variando entre  $10^4$  e  $10^8$ . Os próprios Kuo *et al.* (2002) empregaram o valor de  $1 \times 10^3$ . No presente trabalho, chega-se à conclusão de que um valor adequado para todas as rigidezes, pesando-se coerência e esforço computacional, é de  $1 \times 10^4$ . No caso dos coeficientes de restituição e coeficientes de atrito, as faixas estudadas por Kuo *et al.* (2002) foram de 0,7 a 0,9 e de 0,3 a 0,6, respectivamente. Aqui, opta-se por empregar os limites inferiores de ambas as faixas. De fato, no caso dos coeficientes de atrito, a maioria das simulações realizadas nos trabalhos examinados utilizam o valor escolhido (0,3). Já no caso do coeficientes de restituição, apesar de 0,9 ser o valor mais comumente utilizado, escolhe-se o menor valor (0,7) porque grande parte dos exemplos a serem estudados aqui envolvem uma contínua adição de energia ao sistema através de movimentos de obstáculos e, deste modo, tal energia pode ser dissipada mais rapidamente. O valor eleito para a densidade das partículas é de  $2,5 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ . Para a densidade do fluido circundante, por sua vez, emprega-se o valor de  $1,2 \text{ kg/m}^3$ , que é calculado para o ar, em condições ambientais, por meio da equação de estado de gás ideal. O módulo da aceleração da gravidade é tomado como  $9,8 \text{ m/s}^2$ .

Os valores dos parâmetros selecionados até aqui serão comuns a todas as simulações realizadas neste trabalho. Os diâmetros das partículas, por sua vez, podem variar de caso para caso. Um outro parâmetro a se determinar é o número de passos de integração por colisão, introduzido na Seção 5.7 e simbolizado por  $\Phi$ . Neste caso, como na metodologia desenvolvida nesta tese se emprega um método de integração inédito em relação ao DEM, convém realizar testes para se determinar o seu valor. No caso do método explícito representado na Tabela 5.7.1 como o “Esquema A”, Tsuji *et al.* (1993) afirmam que um valor de  $\Phi = 5^*$  é suficiente para manter a estabilidade do método e para promover uma adequada dissipação de energia. Contudo, nada foi mencionado a respeito da precisão na descrição das trajetórias das partículas. Walton e Braun (1986), por sua vez, afirmam que valores de  $\Phi$  da ordem de 40 a 50 são necessários para se alcançar uma “precisão aceitável” em tal descrição, o que foi reafirmado, mais tarde, por Vu-Quoc e Zhang (1999). Utilizando um método de predição e correção de 2<sup>a</sup> ordem, Cleary e Hoyer (1999) informaram ter sido necessário um total de 20 a 50 passos para se integrar de acuradamente cada colisão.

Neste trabalho, para se determinar um valor apropriado para  $\Phi$ , considerando-se as escalas de tempo e comprimento a serem abordadas nas simulações, realiza-se o seguinte procedimento: posiciona-se o centro de uma partícula com diâmetro igual a 0,01 m, inicialmente em repouso, a uma altura de 0,20 m em relação a uma parede plana horizontal. Adotam-se os valores já definidos para os parâmetros, com exceção do coeficiente de restituição, que é fixado em 1, de modo a tornar o sistema conservativo. Então, integram-se as equações do movimento da partícula por 10 s, utilizando-se diversos valores de  $\Phi$ . Neste período, a partícula deve se chocar com a parede diversas vezes e, se a integração do seu movimento for precisa, atingir uma altura máxima de 0,20 m após cada choque. As alturas máximas resultantes da integração com  $\Phi = 5$ ,  $\Phi = 10$ ,  $\Phi = 20$  e  $\Phi = 50$ , em função do instante nos quais elas são alcançadas, encontram-se no gráfico da Figura 6.2.1. Como se pode observar, a precisão do método fica comprometida com  $\Phi = 5$ , já que ocorrem desvios quase sistemáticos da altura máxima em relação aos 0,20 m. Nos outros casos, porém, os desvios são bem menores. Assim sendo, julga-se  $\Phi = 10$  como um valor suficiente para se realizar

---

\* De fato, no trabalho de Tsuji *et al.* (1993), diferentemente de como é realizado aqui, o tempo estimado de uma colisão é calculado considerando-a sempre conservativa.

integrações com uma precisão não apenas aceitável, mas realmente boa. Uma vez que o tempo consumido por um método de predição e correção na execução de um único passo de integração praticamente independe da sua ordem, pode-se supor, baseando-se nas informações relatadas no parágrafo anterior, que o método aqui empregado promove um expressivo ganho de eficiência (inverso do tempo total de simulação necessário para se obter uma dada precisão) em relação aos métodos empregados por outros autores. Por fim, apresentam-se, na Tabela 6.2.1, os parâmetros comuns a todas as simulações realizadas neste trabalho, cujos resultados serão expostos no presente capítulo.

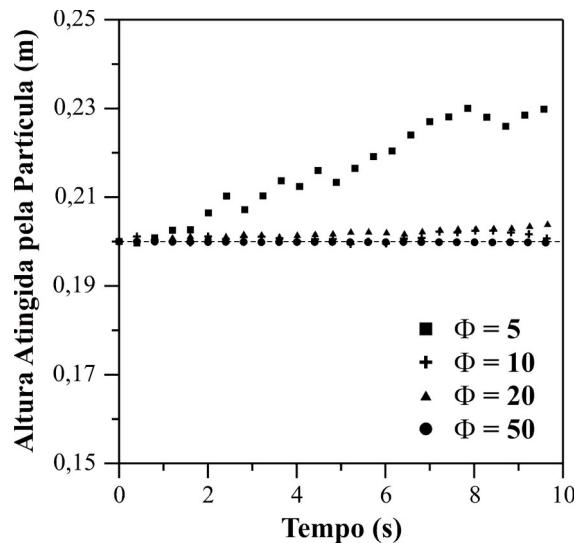


Figura 6.2.1 – Altura máxima atingida por uma partícula após choques supostamente conservativos com uma parede horizontal, para diferentes valores de  $\Phi$ .

Tabela 6.2.1 – Parâmetros comuns a todas as simulações.

Parâmetros	Valores
Rigidezes ( $k_i^{\{n\}}, k_i^{\{t\}}, k_k^{\{n\}} \text{ e } k_k^{\{t\}}$ )	$1 \times 10^4 \text{ N/m}$
Coeficientes de restituição ( $e_{ij}^{\{n\}}, e_{ij}^{\{t\}}, e_{ik}^{\{n\}} \text{ e } e_{ik}^{\{t\}}$ )	0,7
Coeficientes de atrito ( $\mu_{ij} \text{ e } \mu'_{ik}$ )	0,3
Número de passos por colisão ( $\Phi$ )	10
Densidade das partículas ( $\rho_i$ )	$2,5 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$
Densidade do fluido ( $\rho_f$ )	$1,2 \text{ kg/m}^3$
Vetor aceleração da gravidade ( $\mathbf{g}$ )	$[0 \ 0 \ - 9,8]^T \text{ m/s}^2$

### 6.3 – Formação de Leitos Monodispersos de Esferas

No Capítulo 4, estudou-se o arranjo de leitos compactos de esferocilindros através do Método de Monte Carlo. Como um caso particular, obtinham-se leitos de esferas, que são esferocilindros com razão de alongamento nula. Devido às características do método, não era possível avaliar o processo de formação de tais leitos, mas apenas as suas configurações finais. No entanto, isto se torna factível, no caso de esferas, com o emprego da formulação do DEM exposta no capítulo anterior. Para isto, simula-se um sistema formado por um recipiente cilíndrico com diâmetro ( $D$ ) igual a 0,12 m e altura igual ( $H$ ) a 0,30 m, cujo centro se encontra na origem de um espaço cartesiano e cujo eixo longitudinal coincide com o eixo z. Então, para se formar um leito compacto, depositam-se no recipiente 2500 partículas de diâmetro igual a 0,01 m. A tentativa de inserção no sistema de uma partícula de diâmetro  $d_i$  é efetuada através da escolha aleatória de um ponto, para alocação de seu centro, na região superior do recipiente. Para isto, geram-se dois valores,  $\Gamma$  e  $\Theta$ , através de

$$r = \frac{(D - d_i)}{2} \text{rand} \quad \text{e} \quad (6.3.1)$$

$$\theta = 2\pi \text{rand}, \quad (6.3.2)$$

onde  $\text{rand}$  é um símbolo que representa números aleatoriamente recolhidos de uma distribuição uniforme entre 0 e 1. Então, tenta-se inserir a nova partícula na posição

$$\mathbf{r}_i = \begin{bmatrix} r \cos \theta \\ r \sin \theta \\ (H - d_i)/2 \end{bmatrix}. \quad (6.3.3)$$

Com isto, garante-se que a partícula será inserida no interior do cilindro. Uma tentativa será aceita se, e somente se, nenhuma interpenetração for promovida entre a nova partícula e aquelas já previamente introduzidas no recipiente. A deposição das  $N_p$  partículas é realizada seqüencialmente, ao longo de uma simulação. A cada passo de integração, busca-se inserir uma única partícula. Caso não se obtenha êxito em um máximo de 10 tentativas, efetiva-se o passo mesmo sem se cumprir a inserção. Em caso

positivo, anulam-se as velocidades translacional e angular da nova partícula, acoplam-se as equações referentes ao seu movimento ao sistema em solução e, finalmente, efetua-se o passo de integração em questão. Assim, conforme as partículas forem se dirigindo ao fundo do recipiente, por efeito da gravidade, novos espaços serão disponibilizados para a inserção de mais partículas, até que todas as  $N_p$  tenham sido devidamente introduzidas. Após isto, um número de passos adicionais é realizado até que se alcance uma configuração estática, ou seja, até que toda a energia cinética do sistema se dissipe.

Para o caso em questão, o leito obtido após a deposição das 2500 partículas é mostrado na Figura 6.3.1(a). Utilizando-se a metodologia exposta no Capítulo 3, Seção 3.5.1, calcula-se a sua fração global de vazios como 0,388 (com  $\nu_1 = 0,4$  e  $\nu_2 = 0,7$ ). Este valor é significativamente mais baixo que aqueles calculados para leitos gerados com o Método de Monte Carlo, que apresentam média igual a 0,4478 (vide Tabela 4.2.2). Para fins de comparação, expõe-se na Figura 6.3.1(b) um destes leitos, cuja fração global de vazios é 0,445. As dimensões do cilindro e das partículas, bem como o número destas, é idêntico nos dois leitos retratados na Figura 6.3.1. Diante disto, claramente se observa, contrastando-se as alturas dos leitos, que aquele produzido com o DEM é mais compacto. Uma observação mais minuciosa mostra que, neste leito, as partículas ocupam mais eficientemente o espaço interno da caixa, formando interstícios de menor volume (observe-se, por exemplo, a forma como as partículas se dispõem no fundo do cilindro). Isto se dá, principalmente, porque o DEM consegue captar, de forma mais eficaz, a influência do movimento de uma partícula sobre os das suas circundantes. Por exemplo, se uma partícula, para se acomodar, necessitar impelir aquelas com as quais está em contato, estas impelirão outras ao redor, e assim por diante, até que se possibilite a acomodação da primeira. Um outro fator que contribui para a redução no valor calculado da fração de vazios do leito gerado através do DEM é a possibilidade de interpenetrações. Primeiramente, porque isto pode permitir a travessia de partículas por fendas mais estreitas. Ademais, porque, no próprio cálculo da fração de sólidos de um leito, os volumes de interseção entre as partículas interpenetradas são contabilizados duas vezes, levando a uma superestimação de tal fração e a uma consequente subestimação do valor da fração de vazios. Entretanto, acredita-se que esta contribuição seja diminuta, já que os níveis de interpenetração entre as partículas são baixos para os

valores de rigidez adotados. Na configuração da Figura 6.3.1(a), por exemplo, o máximo valor de  $\delta_{ij}^{(n)}$  entre os pares em contato corresponde a apenas 1,03% do diâmetro das partículas.

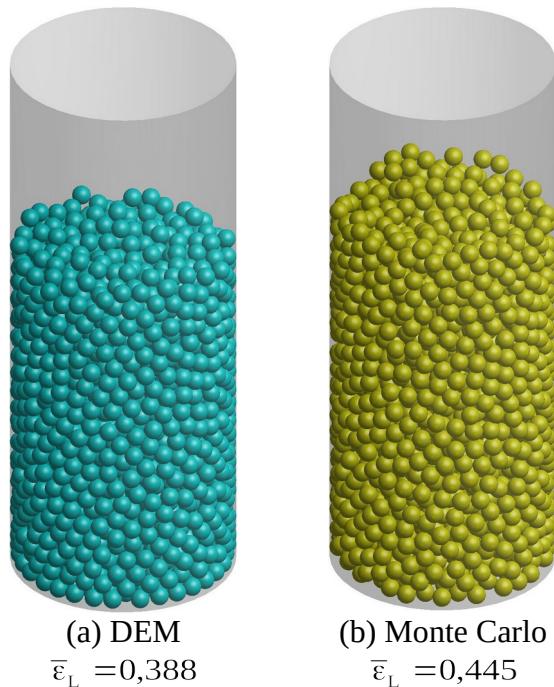


Figura 6.3.1 – Comparaçao entre leitos compactos de esferas obtidos por diferentes métodos de simulação.

A fração global de vazios do leito obtido pela deposição de partículas ainda é maior que aqueles relatados para aqueles produzidos por compactações do tipo classificado como *random-close packing*, que é de aproximadamente 0,36 (Reyes e Iglesia, 1991). Rosato e Yacoub (2000) afirmam, baseando-se em dados experimentais, que é possível aumentar a densidade de compactação de um leito granular através de agitações mecânicas de alta freqüência e baixa amplitude, o que demonstram através de resultados para valores de  $A_{vib}/d \leq 0,1$  (onde  $A_{vib}$  é a amplitude das vibrações e  $d$  é o diâmetro das partículas). Tais autores ainda realizam simulações com o Método de Elementos Distintos, que transcrevem adequadamente as observações experimentais. No presente trabalho, tal procedimento pode ser adotado através da definição de funções periódicas para as posições e velocidades dos obstáculos que, no caso em questão, são as paredes do recipiente cilíndrico. Utiliza-se, então, a seguinte função senoidal para a posição de cada obstáculo “k”:

$$\mathbf{r}'_k(t) = \mathbf{r}_k^{(0)} + A_{vib} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \sin(2\pi f_{vib} t) \end{bmatrix} \quad \forall k = 1, \dots, N_{ob}, \quad (6.3.4)$$

onde  $\mathbf{r}_k^{(0)}$  é a posição inicial do obstáculo “k” e  $A_{vib}$  e  $f_{vib}$  são, respectivamente, a amplitude e a freqüência de vibração. Assim sendo, a velocidade de cada obstáculo será dada por

$$\mathbf{v}'_k(t) = 2\pi f_{vib} A_{vib} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \cos(2\pi f_{vib} t) \end{bmatrix} \quad \forall k = 1, \dots, N_{ob}. \quad (6.3.5)$$

A aceleração de um obstáculo “k”, sendo a derivada da função acima, terá o seu valor máximo dado por  $4\pi^2 f_{vib}^2 A_{vib}$ . Assim, costuma-se definir a aceleração relativa de uma vibração ( $\Gamma$ ) como a razão entre tal valor e o módulo da aceleração da gravidade, ou seja,

$$\Gamma = \frac{4\pi^2 f_{vib}^2 A_{vib}}{g}. \quad (6.3.6)$$

Desta forma, o parâmetro  $\Gamma$  é, geralmente, utilizado para quantificar a intensidade de uma vibração senoidal. Então, partindo-se da configuração representada na Figura 6.3.1(a), efetua-se uma vibração, durante um tempo simulado de 30 s, com amplitude de 0,001 m e freqüência de 49,82 Hz, que equivalem a uma razão  $A_{vib}/d = 0,1$  e a uma aceleração relativa  $\Gamma = 10$ , que são valores contemplados no mencionado estudo de Rosato *et al.* (2002). Após os 30 s, cessa-se a vibração e prossegue-se a simulação por mais 1 s, com o intuito de se obter um leito estático, o qual é representado na Figura 6.3.2. Como se observa, o leito obtido apresenta um elevado grau de ordenação, distinguindo-se largamente daqueles da Figura 6.3.1. Sua fração global de vazios, calculada da mesma maneira, é igual a 0,364, comprovando a referida densificação.

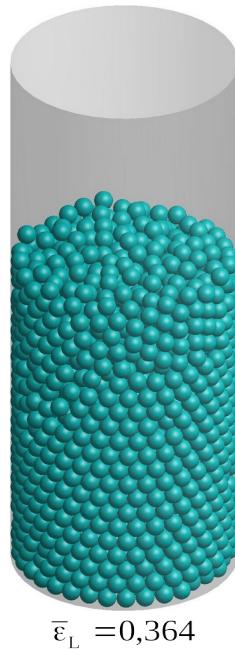


Figura 6.3.2 – Leito de esferas obtidos após 30 s de vibração mecânica com  $A_{vib}/d = 0,1$  e  $\Gamma = 10$ .

No presente trabalho, pode-se avaliar a modificação estrutural ocorrida no leito, após o processo de agitação mecânica, por meio do cálculo dos perfis radiais de frações de vazios das configurações anterior e posterior ao processo. Isto é feito exatamente da maneira explicada nos Capítulos 3 e 4 (Seções 3.5.2 e 4.2.3). Os resultados obtidos estão expostos na Figura 6.3.3. A principal diferença que se nota é uma oscilação bem mais intensa no caso na Figura 6.3.3(b), referente ao leito obtido após as vibrações, que aparentemente se prolonga até a região central do leito. Isto já poderia ser esperado, visto que tais oscilações estão diretamente ligadas ao grau de ordenação do leito nas proximidades da parede lateral. Outra diferença reside nos valores mínimos de fração radial de vazios, correspondentes aos vales das curvas. Para o primeiro vale, por exemplo, o valor atingido no caso da Figura 6.3.3(a) é de 0,217, enquanto no caso da Figura 6.3.3(b) é de 0,143. Uma terceira diferença ocorre nos picos das curvas, principalmente no primeiro pico da Figura 6.3.3(b), no qual se observa uma nítida deformação. O ponto culminante, em si, encontra-se a uma distância da parede equivalente a um diâmetro de partícula ( $0,01\text{ m}$ ), o que provém do fato de que uma camada ordenada de partículas se forma no contato com tal parede (Govindarao e Froment, 1986). A mencionada deformação, que ocorre a distâncias um pouco menores que  $0,01\text{ m}$ , assemelha-se àquela analiticamente calculada para leitos ordenados

formados sobre paredes planas [conforme ilustrado no artigo de Ridgway e Tarbuck (1968)], porém menos acentuada. No referido caso, o que se observa é, na verdade, um duplo pico a distâncias em torno de um diâmetro de partícula, decorrente da interferência entre as duas primeiras camadas de partículas formadas junto à parede.

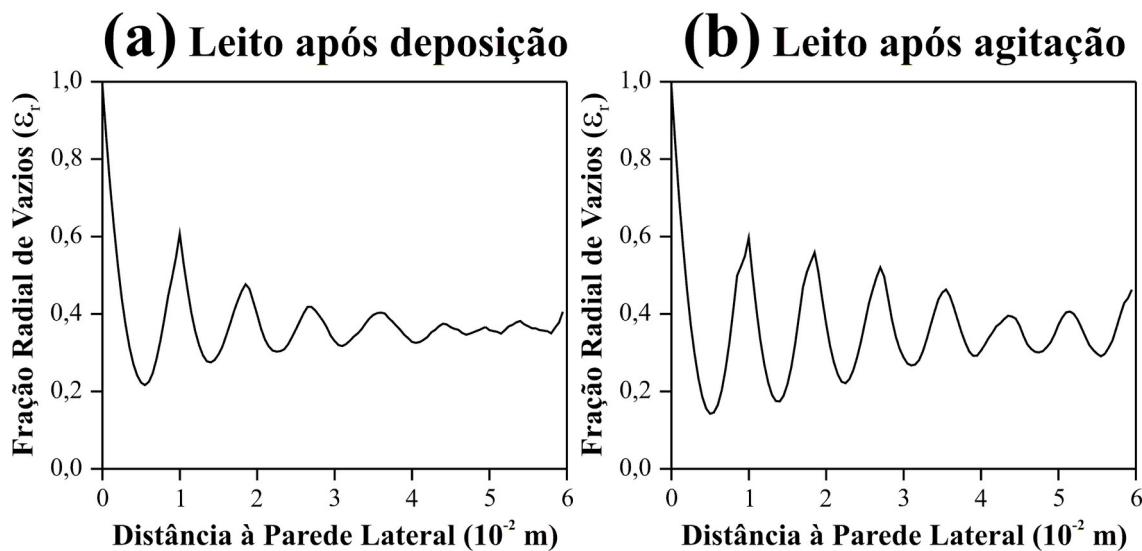


Figura 6.3.3 – Perfis radiais de frações locais de vazios dos leitos obtidos antes e após um processo de agitação mecânica.

Com estes exemplos, demonstra-se que o DEM é capaz de descrever, de modo adequado, a formação de leitos compactos e monodispersos de esferas em recipientes cilíndricos. Além disto, servem como uma espécie de validação para o programa computacional desenvolvido, pois são corroborados tanto por dados experimentais quanto por simulações realizadas por outros autores.

#### 6.4 – Segregação por Diferenças de Tamanho em Misturas Binárias

Um outro estudo importante, passível de ser realizado com o Método de Elementos Discretos implementado neste trabalho, refere-se ao já mencionado Efeito Castanha-do-Pará, ou seja, a segregação por diferenças de tamanho provocada em misturas de partículas sujeitas a vibrações mecânicas. Estudos deste tipo vêm sendo realizado por diversos autores, tal como consta em uma revisão realizada por Rosato *et al.* (2002). Aqui, primeiramente se constrói, em um recipiente cilíndrico com dimensões idênticas às daquele descrito na seção anterior, um leito formado por partículas de duas espécies, referidas como Espécie (A) e Espécie (B), com diâmetros de 0,01 m e 0,02 m, respectivamente. O número total de partículas especificado é 900, sendo 800 da Espécie (A) e 100 da Espécie (B), de modo que os volumes totais das duas espécies sejam iguais, uma vez que  $v^{(B)} = 8v^{(A)}$  (onde  $v^{(\alpha)}$  é o volume das esferas de uma espécie  $\alpha$ ). O leito é obtido por deposição, como aquele retratado na Figura 6.3.1(a), sendo as espécies depositadas em ordem decrescente de tamanho, ou seja, primeiramente se depositam todas as partículas maiores e, somente após isto, as menores. Desta forma, obtém-se um leito segregado, porém com disposição contrária àquela que supostamente seria produzida pelo Efeito Castanha-do-Pará. Tomando-se tal leito como configuração inicial, efetuam-se vibrações mecânicas senoidais, prescrevendo-se os movimentos das paredes do cilindro através das funções correspondentes às Equações (6.3.4) e (6.3.5). Neste caso, para se evitar a fuga de partículas, empregam-se recipientes fechados, isto é, com paredes também no topo.

Realizam-se algumas simulações com valores distintos de amplitude e freqüência. Os valores escolhidos se baseiam nas dimensões das partículas e na aceleração da gravidade. Três amplitudes ( $A_{\text{vib}}$ ), 0,005 m, 0,01 m e 0,02 m, são testadas. Para as freqüências, adotam-se valores que resultem em uma determinada aceleração relativa, igual nos três casos. Para uma aceleração máxima de vibração menor ou igual à da gravidade, ou seja, para  $\Gamma \leq 1$ , deduz-se que não haveria movimento relativo das partículas entre si e com o recipiente e, assim, nenhum fenômeno de segregação poderia ocorrer. Portanto, deve-se estabelecer um valor de  $\Gamma$  maior que a unidade. Escolhe-se, então,  $\Gamma = 2$ , de modo que as freqüências de vibração ( $f_{\text{vib}}$ ) devem ser iguais a 9,965

Hz (para  $A_{vib} = 0,005\text{ m}$ ), 7,046 Hz (para  $A_{vib} = 0,01\text{ m}$ ) e 4,982 Hz (para  $A_{vib} = 0,02\text{ m}$ ). O tempo de simulação, nos três casos, é de 20 s. Para se acompanhar um possível processo de segregação, adota-se o mesmo artifício utilizado no caso das simulações de Monte Carlo, ou seja, calcula-se, ao longo de uma simulação, a diferença entre as alturas médias das partículas pertencentes a cada espécie, ou seja,  $z^{\{B\}} - z^{\{A\}}$  [Cf. Capítulo 4, Equações (4.3.1) e (4.3.2)]. Apresentam-se os resultados obtidos na Figura 6.4.1.

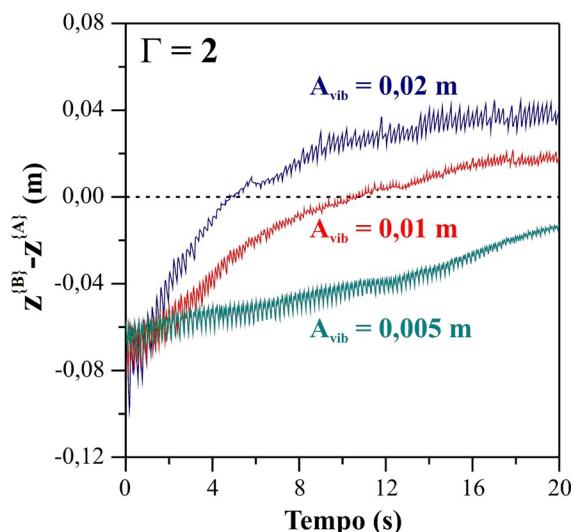


Figura 6.4.1 – Estudo da segregação de misturas binárias submetidas a vibrações mecânicas de mesma aceleração relativa, mas de amplitudes distintas.

Para a configuração inicial, comum nos três casos estudados, o valor de  $z^{\{B\}} - z^{\{A\}}$  é negativo, visto que as partículas da Espécie “B” se encontram no fundo do recipiente, enquanto as da Espécie “A” se encontram no topo. Após o início das vibrações, observam-se, para os três casos, perfis oscilatórios de  $z^{\{B\}} - z^{\{A\}}$ , porém com nítidas tendências de crescimento. Já que cada simulação têm início em um estado segregado, convém dividir o processo em duas etapas, sendo a primeira uma misturação (até que  $z^{\{B\}} - z^{\{A\}}$  se iguale a zero) e a segunda uma segregação, propriamente dita. Observa-se que, para a maior amplitude ( $A_{vib} = 0,02\text{ m}$ ), a primeira etapa termina entre 4 e 5 s e, para a amplitude intermediária ( $A_{vib} = 0,01\text{ m}$ ), entre 10 e 11 s. Já para a menor amplitude considerada ( $A_{vib} = 0,005\text{ m}$ ), a primeira etapa não chega a terminar em 20 s. Para os dois primeiros casos, após o término da misturação, observa-

se o Efeito Castanha-do-Pará, pois permanece a tendência de crescimento das correspondentes curvas. Nos estudos com o DEM, pode-se comparar as diferentes taxas de misturação e segregação dos processos simulados, o que não é possível nos estudos com o Método de Monte Carlo, visto que este não envolve a variável tempo. Assim sendo, para os três casos simulados com aceleração relativa igual a 2, conclui-se que há um aumento destas taxas quando se eleva a amplitude de vibração, dadas as inclinações das curvas da Figura 6.4.1.

Para ilustrar os resultados obtidos, mostram-se, na Figura 6.4.2, a configuração inicial e configurações relativas a instantes finais das três simulações. Como critério, toma-se aquela correspondente ao final do último período completo de vibração antes de 20 s, garantindo-se que todos os recipientes estarão na mesma posição e em movimento ascendente. Observa-se que, em nenhum dos casos, ocorre segregação completa durante o intervalo de tempo simulado.

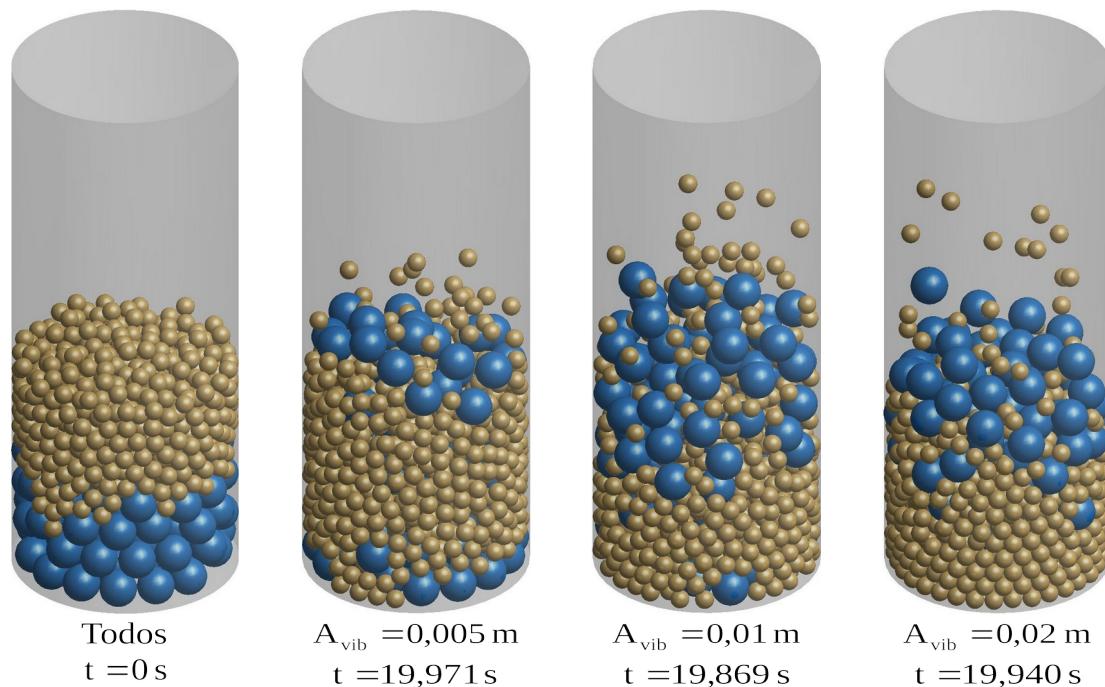


Figura 6.4.2 – Configurações correspondentes às simulações de misturas binárias sujeitas a vibrações com  $\Gamma = 2$  e diferentes amplitudes.

Há uma característica dos sistemas simulados que não é observável através dos perfis da Figura 6.4.1, e pode apenas se ser vislumbrada com auxílio da Figura 6.4.2 (principalmente para o caso em que  $A_{vib} = 0,005 \text{ m}$ ). No entanto, afirma-se que, em todos os casos, a ascensão das maiores partículas ocorre pela região central do leito, ou seja, próxima ao eixo longitudinal do cilindro, enquanto a descensão das menores ocorre nas proximidades da parede lateral. Isto caracteriza a formação de células de convecção, o que já foi observado, tanto experimentalmente quanto por simulações, mesmo para leitos monodispersos (Yang e Hsiau, 2000). De acordo com Rosato *et al.* (2002), a concentração de partículas maiores no topo de leitos que exibem tais células de convecção ocorre devido a um mecanismo baseado no preenchimento de vazios formados no leito, análogo àquele explicado na última seção do Capítulo 3. Segundo os referidos autores, esferas que se aproximam da parede lateral do cilindro tendem a se mover para baixo, abrindo espaço para que outras as sigam. Entretanto, é relativamente improvável que os espaços abertos pelas partículas menores sejam suficientes para acomodar as maiores. Conseqüentemente, as menores partículas tendem a circular por baixo das maiores, as quais permanecem na região superior do leito.

Também é possível avaliar o que ocorre quando se mantém a amplitude de vibração e se varia a aceleração relativa. Para isto, fixa-se o valor de  $A_{vib}$  em  $0,01 \text{ m}$  e realizam-se mais duas simulações, com  $\Gamma = 3$  e  $\Gamma = 4$ . Na Figura 6.4.3, expõem-se os novos resultados, juntamente com aquele anteriormente obtido para  $\Gamma = 2$ . Observa-se que a influência da aceleração relativa não é significativa quando seu valor aumenta de 2 para 3, nem nas taxas de misturação e segregação, e nem no patamar final de  $z^{(B)} - z^{(A)}$ . Já para  $\Gamma = 4$ , o aumento das taxas é notável, visto que a igualdade nas alturas médias das espécies é atingida em pouco mais que 3 s. Também podem ser notados, neste último caso, uma diferença mais acentuada entre as taxas de misturação e de segregação e uma leve tendência de queda no valor de  $z^{(B)} - z^{(A)}$  após cerca de 16 s de simulação, o que poderia significar o início de um processo inverso de misturação. Entretanto, as pronunciadas oscilações da curva, naturalmente promovidas pelo movimento do leito, impedem que se tire uma conclusão definitiva a respeito disto. Imagens semelhantes às da Figura 6.4.2, mas correspondentes aos resultados obtidos neste novo estudo, podem ser observadas na Figura 6.4.4.

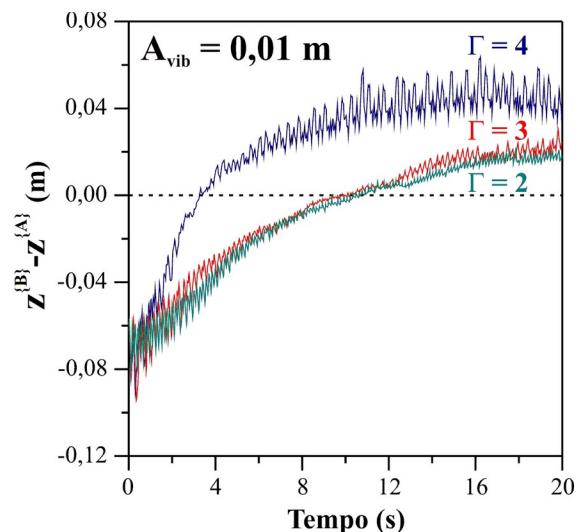


Figura 6.4.3 – Estudo da segregação de misturas binárias submetidas a vibrações mecânicas de mesma amplitude, mas de acelerações relativas distintas.

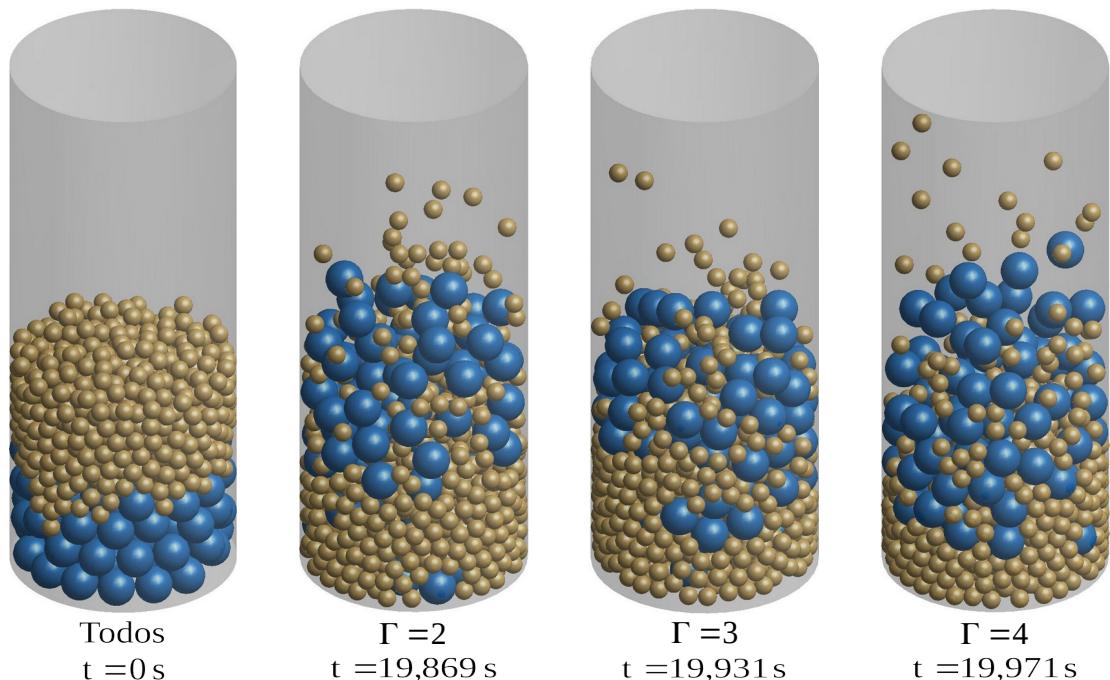


Figura 6.4.4 – Configurações correspondentes às simulações de misturas binárias sujeitas a vibrações com  $A_{vib} = 0,01\text{ m}$  e diferentes acelerações relativas.

## 6.5 – Escoamento de Materiais Granulares em Silos e Tremonhas

Segundo Yang e Hsiau (2001), “aproximadamente metade dos produtos e três quartos das matérias-primas da indústria química se apresentam na forma de materiais granulares e são usualmente armazenados em silos”. Em geral, a descarga do material contido em um silo ou em uma tremonha é realizada apenas por efeito da gravidade. Apesar da vasta utilização, ainda não há conceitos estabelecidos a respeito dos comportamentos observados durante o fluxo de partículas em tais equipamentos. É costume classificar os padrões de escoamento em dois tipos distintos, denominados de “escoamento em massa” (*mass flow*) e “escoamento afunilado” (*funnel flow*). O primeiro tipo é identificado quando todas as regiões do material no interior de um silo estão em movimento. Este é o padrão de fluxo desejado durante um processo de descarga, pois é benéfica a ocorrência de uma contínua renovação do material armazenado. Por outro lado, nos escoamentos classificados como afunilados, observam-se atrasos ou mesmo estagnações em algumas regiões, principalmente nas proximidades das paredes do silo. Este tipo de escoamento deve ser evitado, pois decorre em tempos de residência muito elevados para algumas porções do material armazenado, o que pode trazer prejuízos à sua qualidade.

Com o intuito de se avaliar o escoamento gravitacional em equipamentos como silos e tremonhas, efetua-se a simulação do movimento de um leito de partículas no interior de um recipiente em cujo fundo se encontra um orifício. Para isto, inicialmente se considera um cilindro de diâmetro ( $D$ ) igual a 0,20 m e altura ( $H$ ) igual a 0,40 m, com fundo fechado. Através da metodologia descrita na Seção 6.3, depositam-se nele 10000 partículas de diâmetro ( $d$ ) igual a 0,01 m, de modo a se obter um leito compacto. Como se pode notar, o número de partículas ( $N_p$ ) adotado neste estudo é bem maior que nos anteriores. Então, o leito obtido é utilizado como configuração inicial para uma simulação em um cilindro de mesmas dimensões, porém com um orifício circular, situado no centro da parede de fundo, com diâmetro ( $D_o$ ) igual a 0,05 m, ou seja, cinco vezes maior que o diâmetro de uma partícula.

É comum, em estudos experimentais a respeito de escoamentos em silos e tremonhas, preparar-se o leito inicial em forma de camadas alternadas de partículas recobertas com tintas de cores distintas, visando-se facilitar o acompanhamento visual do escoamento através das deformações promovidas em tais camadas. Como, neste trabalho, se dispõe de artifícios para se gerar imagens e animações tridimensionais a partir dos resultados das simulações, convém adotar uma estratégia análoga. Para tanto, consideram-se duas espécies de partículas e classificam-se as 10000 partículas da configuração inicial em ordem crescente de altitudes (componentes  $z$  dos vetores  $\mathbf{r}_i$ ). Então, as 1000 primeiras partículas desta classificação são especificadas como pertencentes à primeira espécie, as 1000 seguintes como sendo da segunda espécie, e assim sucessivamente. Todas as propriedades das partículas das duas espécies são idênticas, com exceção das cores utilizadas na geração das imagens tridimensionais. Algumas configurações instantâneas obtidas após a integração das equações do movimento são mostradas na Figura 6.5.1.

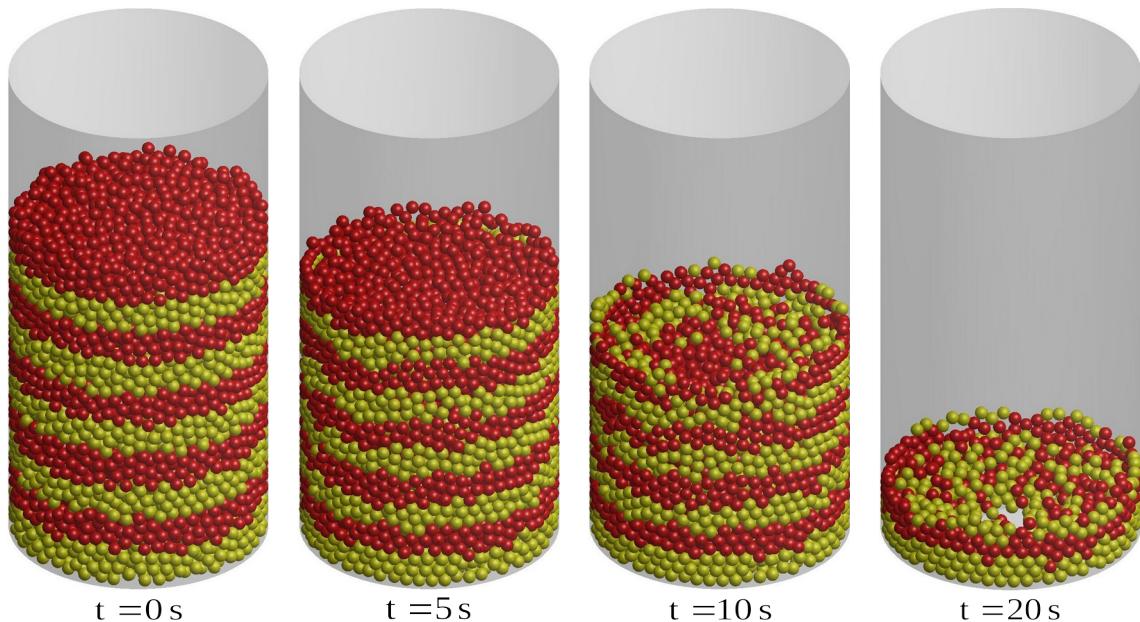


Figura 6.5.1 – Imagens tridimensionais de configurações instantâneas oriundas da simulação do escoamento gravitacional em um silo.

Na Figura 6.5.1, nota-se que muitas partículas que estão em contato com a parede lateral permanecem praticamente imóveis até passarem a figurar no topo do leito, quando então se incorporam ao fluxo que desce através da região próxima ao eixo

longitudinal do cilindro. Como mencionado anteriormente, esta ocorrência de regiões estagnadas, chamadas de “zonas mortas”, é um comportamento típico de escoamentos afunilados. Em estudos sobre a descarga de silos, é comum o emprego de leitos bidimensionais (bastante delgados, no caso de sistemas reais), visando-se poder visualizar o perfil de escoamento na região central e as zonas mortas nas regiões laterais do recipiente (por exemplo, Yang e Hsiau, 2001). Contudo, os padrões observados em silos bidimensionais podem diferir significativamente daqueles que se dão em silos cilíndricos, que formam a maioria dos silos empregados industrialmente. Em termos práticos, métodos óticos são inadequados para se acompanhar o movimento de partículas no interior de um leito cilíndrico, o que tornaria necessária a adoção de métodos tomográficos ou de ressonância magnética, que requerem instrumentos de alto custo. Assim sendo, uma das vantagens da utilização do DEM é que parte das partículas simuladas pode ser ocultada nas imagens e animações geradas, de modo a se poder examinar o escoamento interno de um leito. Na Figura 6.5.2, por exemplo, apresentam-se imagens geradas a partir das mesmas configurações retratadas na Figura 6.5.1, porém ocultando-se todas as partículas cujos centros estejam no lado negativo do eixo x. Com isto, notam-se as deformações causadas pelo escoamento nas faixas alternadas na região central do leito, o que não era possível com a figura anterior.

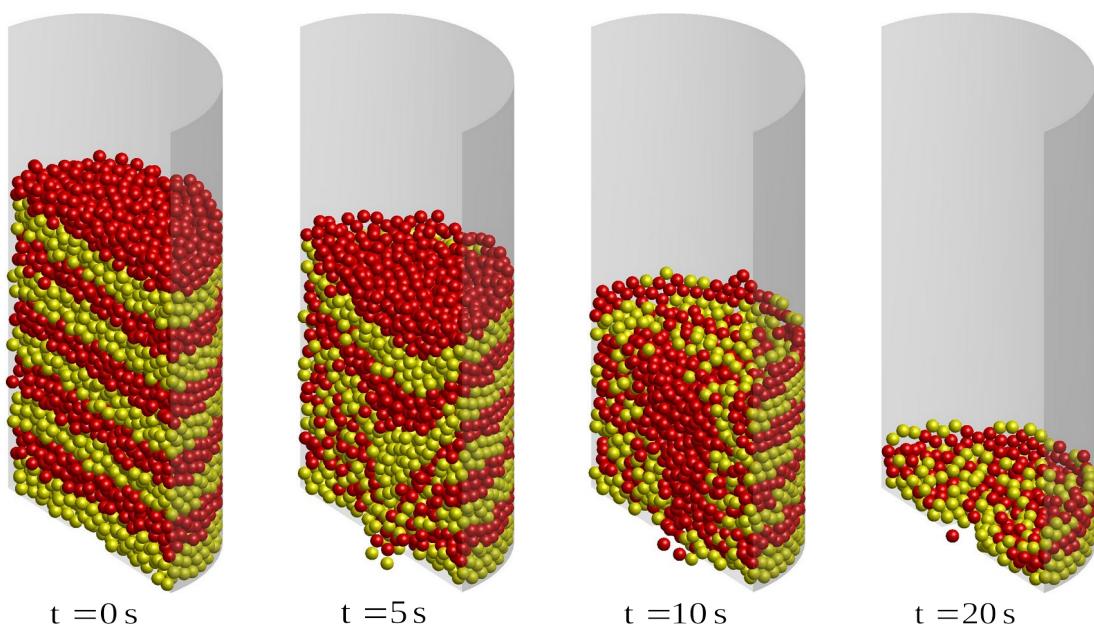


Figura 6.5.2 – Imagens tridimensionais de configurações oriundas da simulação do escoamento em um silo, ocultando-se uma fração das partículas simuladas.

Uma das metas adotadas durante o projeto de um silo é evitar a formação de zonas mortas durante a sua descarga. Acredita-se que, no caso da simulação aqui realizada, a principal causa do escoamento afunilado é a retenção provocada pela parede de fundo, que tende a equilibrar o peso das partículas e, com isto, reduzir a força motriz do escoamento. Uma possível alternativa, muito comumente adotada em silos reais, é a utilização de um fundo cônico, em lugar de um fundo reto, o que pode facilmente ser realizado com o método de simulação aqui implementado. Para isto, define-se um novo parâmetro geométrico para o recipiente simulado, que é o ângulo formado entre a parede de fundo e um plano horizontal, denominado de “ângulo de inclinação” do silo e simbolizado por  $\theta_{inc}$ . Observe-se, para fins de ilustração, o esquema da Figura 6.5.3, onde  $H$  e  $D$  são a altura e o diâmetro da seção cilíndrica do silo, respectivamente,  $h$  é a altura da seção cônica e  $D_o$  é o diâmetro do orifício. Definidos  $D$ ,  $D_o$  e  $\theta_{inc}$ , o valor de  $h$  é calculado por

$$h = \frac{D - D_o}{2} \operatorname{tg} \theta_{inc}. \quad (6.5.1)$$

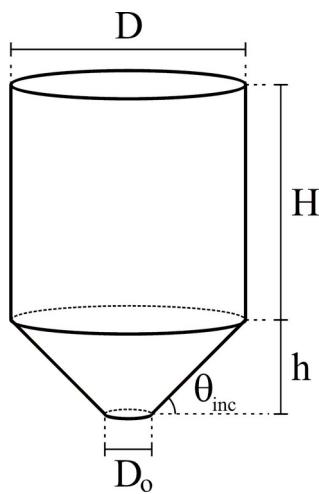


Figura 6.5.3 – Caracterização geométrica de um silo com fundo cônico.

Assim sendo, baseando-se na Figura 6.5.3, pode-se afirmar que o silo relativo às Figuras 6.5.1 e 6.5.2 possui um ângulo de inclinação nulo, ou seja,  $\theta_{inc} = 0$ . Para se avaliar o efeito deste ângulo sobre o escoamento das partículas, efetuam-se mais três

simulações, definindo-se recipientes com as mesmas dimensões do último caso, isto é,  $D = 0,20\text{ m}$  e  $D_o = 0,05\text{ m}$ , mas com ângulos de inclinação de  $30^\circ$ ,  $45^\circ$  e  $60^\circ$  (o que corresponde a valores de  $h$  iguais a  $0,0433\text{ m}$ ,  $0,075\text{ m}$  e  $0,1299\text{ m}$ , respectivamente). O número inicial de partículas, em todos os casos, é também igual a 10000. As configurações iniciais poderiam ser geradas por deposição, como no caso anterior, mas prefere-se aproveitar aquela que já fora criada, trocar a parede de fundo circular pela seção cônica correspondente (com orifício vedado) e, em seguida, permitir que as partículas assentem até que o leito se torne novamente imóvel. A partir de então, definem-se camadas alternadas de partículas através do procedimento exposto na página 169. Cada configuração gerada é, então, atrelada ao respectivo recipiente com orifício aberto, dando-se início à simulação, propriamente dita. Algumas configurações instantâneas obtidas ao longo das simulações dos escoamentos nos recipientes com fundos inclinados a  $30^\circ$ ,  $45^\circ$ , e  $60^\circ$  são representadas, através de imagens tridimensionais, nas Figuras 6.5.4, 6.5.5 e 6.5.6, respectivamente.

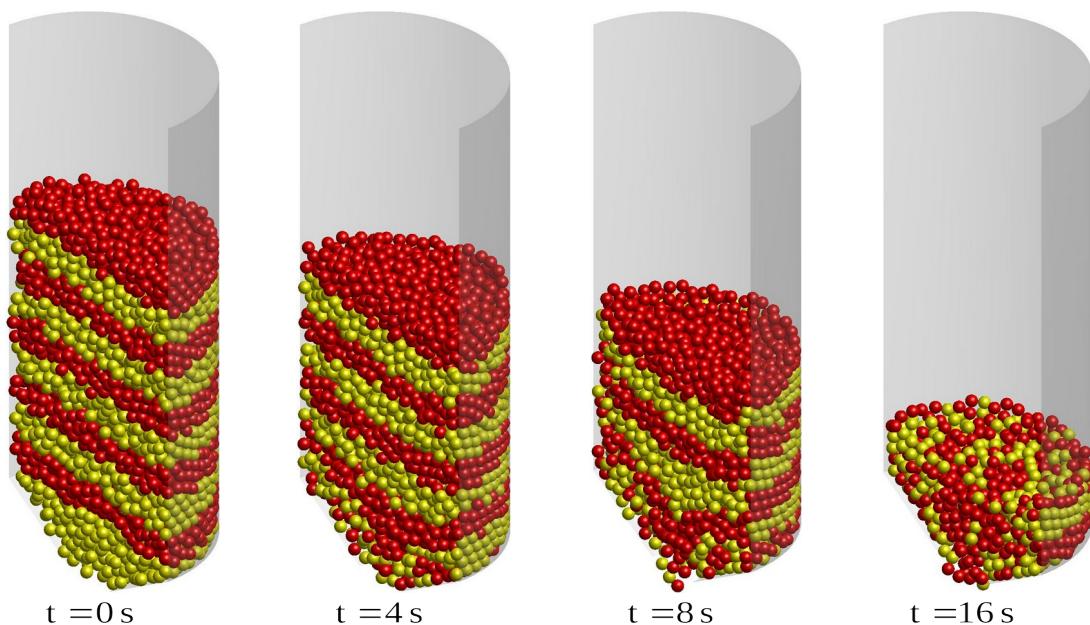


Figura 6.5.4 – Imagens tridimensionais de configurações oriundas da simulação do escoamento em um silo com ângulo de inclinação de  $30^\circ$ .

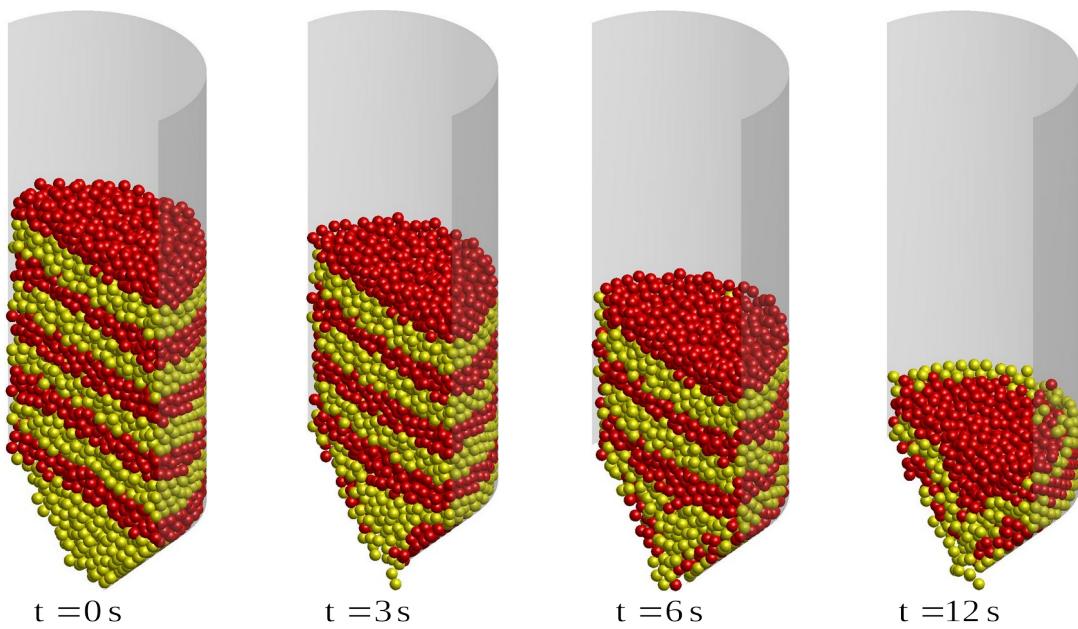


Figura 6.5.5 – Imagens tridimensionais de configurações oriundas da simulação do escoamento em um silo com ângulo de inclinação de  $45^\circ$ .

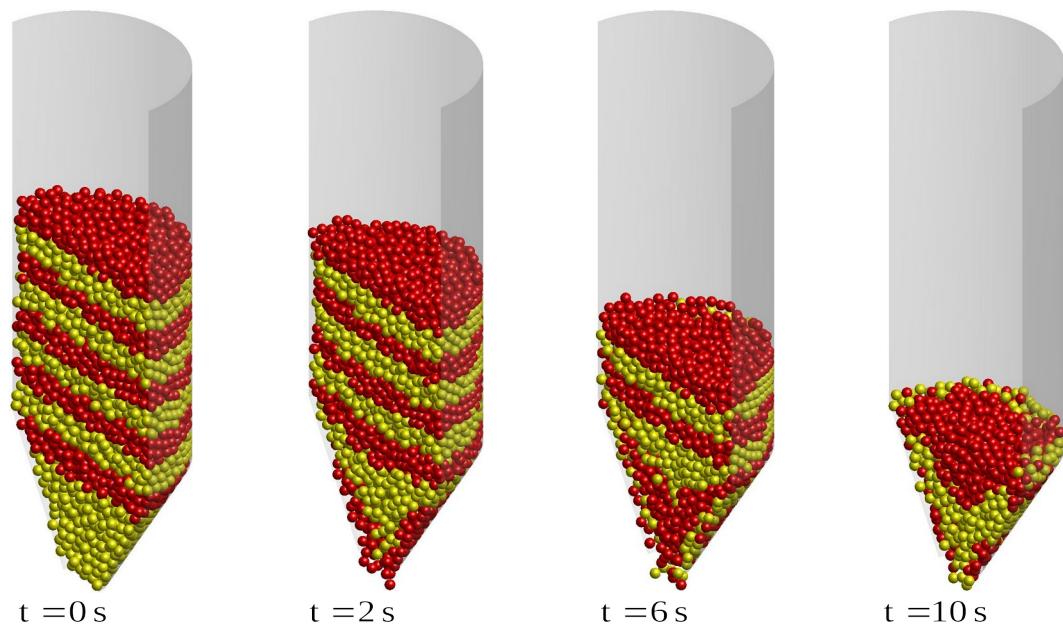


Figura 6.5.6 – Imagens tridimensionais de configurações oriundas da simulação do escoamento em um silo com ângulo de inclinação de  $60^\circ$ .

Nos três casos simulados de silos com ângulos de inclinação diferentes de zero, observam-se escoamentos em massa das partículas durante toda a descarga, o que se evidencia pelo aspecto das faixas alternadas na seção cilíndrica de um silo, que quase não se deformam durante o processo, demonstrando que as partículas em uma mesma

altura têm praticamente a mesma velocidade. Apenas quando se aproximam da seção cônica, as partículas próximas à parede lateral sofrem uma certa desaceleração, promovida pela presença da parede de fundo, o que imprime deformações nas referidas faixas. Com isto, deduz-se que as partículas que escoam na região axial do leito devem ganhar velocidade ao se aproximarem do fundo, uma vez que, se isto não ocorresse para compensar a mencionada desaceleração, as deformações das faixas alternadas deveriam se prolongar ao longo da seção cilíndrica. Este efeito compensador não se restringe à seção cônica, mas se estende na seção cilíndrica até determinada altura, a qual diminui com o aumento do ângulo de inclinação do recipiente.

Um resultado conjunto para os sistemas simulados é que o tempo de escoamento das 10000 partículas varia com o ângulo de inclinação do silo. No caso do silo com fundo reto, a descarga total não chega a se completar em 35 s de tempo simulado, pois algumas partículas ficam retidas sobre a parede de fundo. No caso de  $\theta_{inc} = 30^\circ$ , a última partícula deixa o recipiente em torno de 20,9 s. Para os casos de  $45^\circ$  e  $60^\circ$ , isto ocorre por volta de 17,5 s e 13,2 s, respectivamente. Como os orifícios têm todos o mesmo diâmetro, este resultado mostra que a vazão média de partículas através de um deles depende do ângulo de inclinação da parede cônica. Interessa, também, avaliar a variação da vazão instantânea de partículas através do orifício com a altura do leito, em cada um dos sistemas estudados. Para tanto, pode-se analisar o número de partículas no interior de um recipiente em função do tempo simulado, o que é feito através das curvas contidas na Figura 6.5.7. Como se nota, tal função é linear, durante todo o escoamento, para cada recipiente com ângulo de inclinação diferente de zero, e também linear para o caso em que  $\theta_{inc} = 0$  até o instante em que algumas partículas começam a ser retidas pela parede de fundo. Isto significa que a vazão através de um orifício é praticamente constante durante a descarga, ou seja, independente da altura de leito sobre ele, o que é um resultado conhecido para o escoamento gravitacional de sistemas granulares (Gallas e Hermann, 1998). Esta característica é oposta à do escoamento de um fluido, cuja vazão dependeria da altura da coluna acima do orifício, segundo a Lei de Hagen-Poiseuille. As taxas de descarga calculadas a partir das diferentes curvas da Figura 6.5.7, através de regressão linear pelo método dos mínimos

quadrados, juntamente com as correspondentes vazões mássicas, podem ser apreciadas na Tabela 6.5.1.

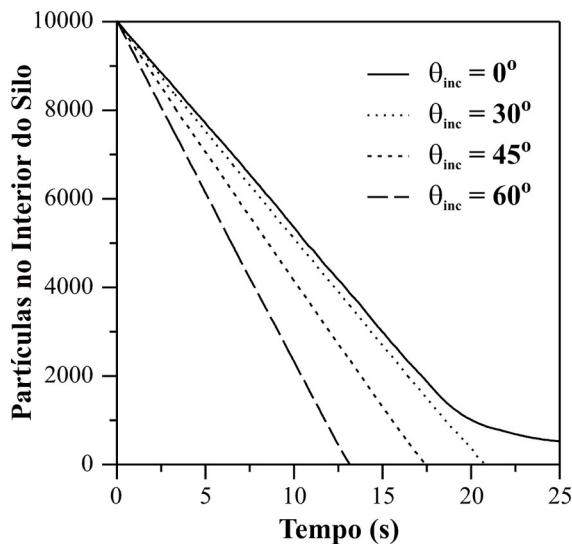


Figura 6.5.7 – Evolução temporal do número de partículas no interior de cada silo com orifício de diâmetro igual a 0,05 m.

Tabela 6.5.1 – Vazões através dos orifícios dos diferentes silos simulados.

Ângulo de Inclinação	Vazão Numérica (partículas/s)	Vazão Mássica (kg/s)
0	468,5	0,613
30º	482,6	0,632
45º	577,2	0,756
60º	764,2	1,000

Finalmente, com o intuito de se avaliar os efeitos de uma redução no diâmetro do orifício ( $D_o$ ) sobre o processo de descarga, simula-se o escoamento em um silo com fundo reto ( $\theta_{inc} = 0$ ) e orifício com diâmetro de 0,04 m, ou seja, quatro vezes maior que o diâmetro das partículas. A configuração inicial, neste caso, é idêntica àquela utilizada na simulação do silo com  $\theta_{inc} = 0$  e  $D_o = 0,05$  m. A evolução temporal do número de partículas no interior do silo é mostrada na Figura 6.5.8. Observa-se que, até cerca de 13,6 s, as partículas atravessam o orifício a uma taxa praticamente constante de 213,9 partículas/s, o que corresponde a uma vazão mássica de 0,280 kg/s, ou

seja, bastante inferior àquelas observadas nos silos com orifícios de 0,05 m de diâmetro. Então, a descarga cessa repentinamente e o número de partículas no interior do recipiente se conserva no valor de 7079 até o final da simulação, o que indica a ocorrência de uma obstrução à passagem das partículas através do orifício. Este “entupimento” ocorre devido à formação espontânea, sobre o orifício, de uma estrutura côncava auto-sustentável, semelhante a uma abóbada. Tal estrutura, constituída por partículas que se escoram umas sobre as outras, é capaz de suportar o seu próprio peso e, ademais, toda a carga imposta pelas partículas sobrejacentes. A estrutura abobadada obtida no exemplo em questão pode ser observada na Figura 6.5.9, que mostra um enquadramento do orifício do silo, tomado abaixo deste e na direção vertical.

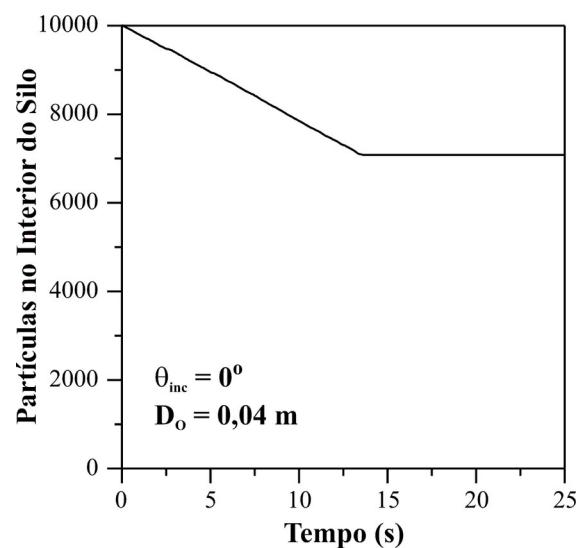


Figura 6.5.8 – Evolução temporal do número de partículas no interior do silo com orifício de diâmetro igual a 0,04 m.

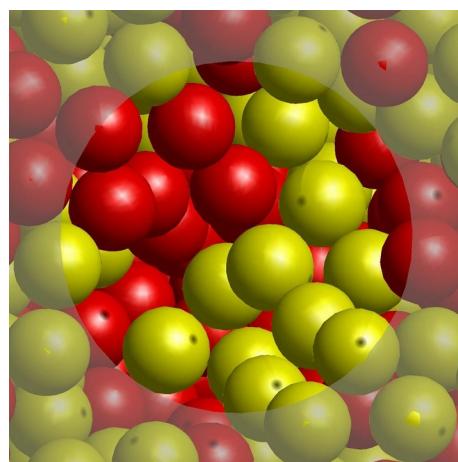


Figura 6.5.9 – Vista inferior da abóbada espontaneamente formada durante a descarga de um silo com orifício de diâmetro igual a 0,04 m.

A formação de uma estrutura como a da Figura 6.5.9 constitui um exemplo claro do chamado efeito cooperativo, já que tal fenômeno provém da ação mútua e simultânea de diversas partículas. Trata-se de um evento casual, cuja probabilidade de ocorrência diminui como o aumento do diâmetro do orifício, já que isto exige a ação coletiva de um número cada vez maior de partículas (no caso simulado em que  $D_o = 0,05\text{ m}$ , por exemplo, tal fenômeno não se concretiza). A formação espontânea de arcos e abóbadas durante o escoamento, tida como uma característica peculiar de sistemas granulares, é um fenômeno bastante estudado, tanto experimentalmente quanto computacionalmente. Conclui-se, a partir do exemplo simulado, que a constatação deste tipo de evento através do DEM é natural, ou seja, não exige a adoção de medidas específicas, mesmo quando se empregam modelos simples para as forças de interação entre as partículas.

## 6.6 – Efeito de Vibrações Horizontais sobre a Descarga de Silos e Tremonhas

Ainda no contexto do escoamento gravitacional em equipamentos como silos e tremonhas, Hunt e colaboradores (1999) realizaram um estudo experimental bastante interessante, no qual avaliaram o efeito de vibrações horizontais sobre a descarga de partículas contidas em um recipiente plano, como o esquematizado na Figura 6.6.1.

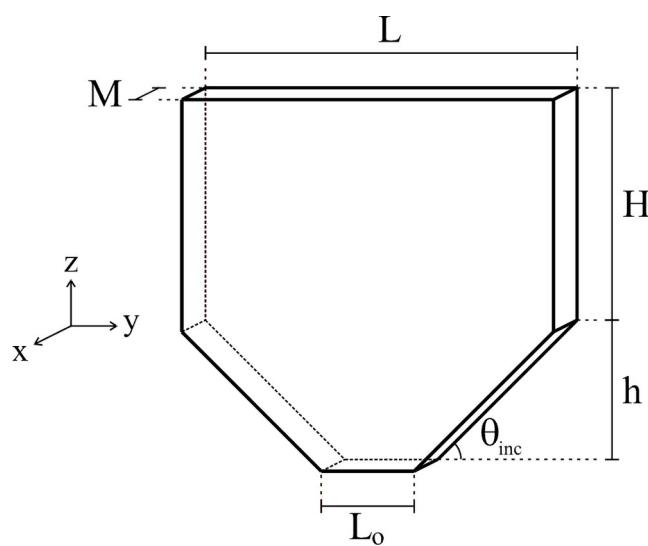


Figura 6.6.1 – Esquema de um recipiente plano para descarga de partículas, tal como o utilizado no trabalho de Hunt *et al.* (1999).

Conforme a notação proposta na Figura 6.6.1, o recipiente utilizado no referido trabalho possuía as dimensões  $L = 0,2975\text{ m}$ ,  $H = 0,19\text{ m}$ ,  $M = 0,0127\text{ m}$ ,  $h = 0,14\text{ m}$ ,  $L_o = 0,0175\text{ m}$  e, por conseguinte,  $\theta_{inc} = 45^\circ$ . Para seu preenchimento, utilizava-se, em cada experimento, 1,2 kg de material composto por esferas de vidro monodispersas com diâmetro de  $1,1 \times 10^{-3}\text{ m}$  ou de  $2,0 \times 10^{-3}\text{ m}$ . Algumas partículas foram pintadas com tinta a base de água, de modo a se poder construir leitos com faixas alternadas, como nos casos da seção anterior, para facilitar a visualização do escoamento. Montou-se o recipiente sobre uma placa de alumínio atrelada a um agitador mecânico que era capaz de promover vibrações senoidais horizontais com valores de freqüência ( $f_{vib}$ ) e aceleração relativa ( $\Gamma$ ) preestabelecidos. A agitação era efetuada na direção da largura do recipiente, o que corresponde à direção y no esquema da Figura 6.6.1. Com este equipamento, realizaram-se experimentos com freqüências variando de 5 Hz a 35 Hz e acelerações relativas variando de 0 a 3 (note-se que  $\Gamma = 0$  representa um recipiente estático durante a descarga).

Demonstrou-se que, para determinada freqüência de vibração, a taxa de descarga de partículas crescia com o aumento da aceleração relativa, e que tal crescimento era mais acentuado para baixas freqüências. Os resultados mais interessantes, contudo, referem-se aos perfis de escoamento obtidos, os quais foram registrados através de fotografias feitas ao longo dos experimentos, por meio de câmeras digitais. Para um caso sem agitação, algumas destas fotografias são mostradas na Figura 6.6.2. Através delas, nota-se a formação de um perfil do tipo afunilado, pois o material localizado no centro do recipiente escoava mais rapidamente. De fato, as partículas situadas junto às paredes laterais permaneciam praticamente imóveis, escoando apenas através de avalanches sobre as superfícies inclinadas que se formavam no topo do leito.

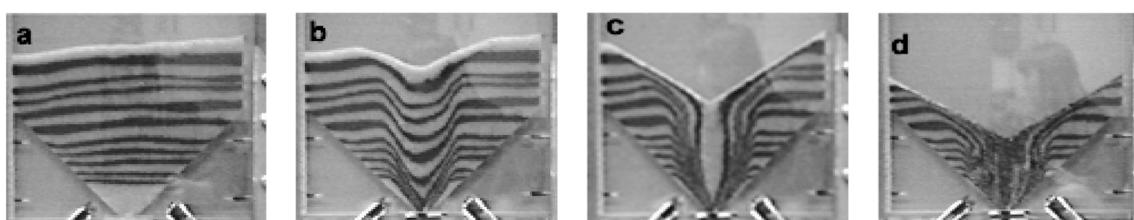


Figura 6.6.2 – Fotografias de um processo de descarga realizado em um recipiente plano sem vibração mecânica (Hunt *et al.*, 1999).

Para vibrações com baixos valores de aceleração relativa ( $\Gamma < 0,5$ ), fosse em qualquer freqüência, o perfil de escoamento não apresentava diferenças em relação ao obtido com recipiente estático. Já para acelerações mais altas ( $\Gamma > 1,1$ ), o perfil passava a depender da freqüência imposta. Para  $f_{vib} = 5 \text{ Hz}$  e  $f_{vib} = 10 \text{ Hz}$ , obtinha-se um fluxo praticamente uniforme, o que caracteriza um escoamento em massa, visto que a superfície superior do leito se mantinha horizontal durante toda a descarga. No entanto, para freqüências de vibração entre 20 e 35 Hz, obtinha-se um resultado inusitado, que pode ser visto na Figura 6.6.3, para o caso de  $f_{vib} = 20 \text{ Hz}$  e  $\Gamma = 2$ . Nota-se que o perfil de escoamento obtido era quase o inverso daquele produzido sem vibrações. As partículas situadas nas proximidades das paredes laterais escoavam mais rapidamente que aquelas localizadas na região central, o que pode ser observado, na Figura 6.6.3, através do modo como as faixas alternadas de partículas com e sem pintura se deformavam durante o processo. A inclinação da superfície superior do leito também é inversa àquela da observada na Figura 6.6.2. Os autores denominaram este novo perfil de “escoamento afunilado invertido” (*inverted-funnel flow*). Isto ocorre porque, durante certo intervalo em cada ciclo de vibração, as partículas situadas junto a uma das paredes inclinadas laterais perdem contato com ela e, com isto, permanecem em queda livre até se conectar novamente à parede. Então, a alternância deste evento entre os dois lados do recipiente torna-se responsável pelo perfil de escoamento observado.

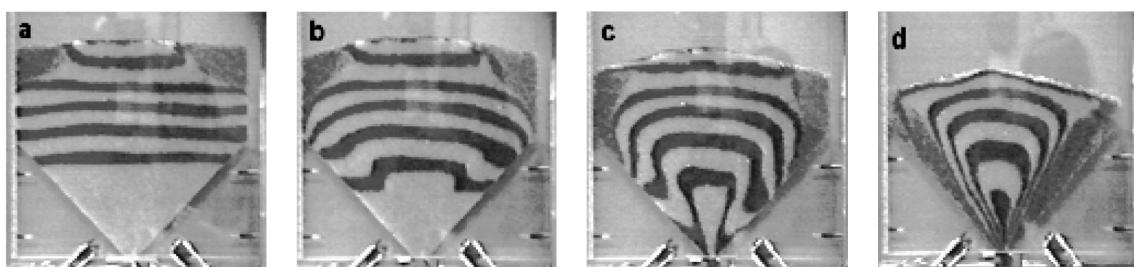


Figura 6.6.3 – Fotografias de um processo de descarga realizado em um recipiente plano horizontalmente vibrado com  $f_{vib} = 20 \text{ Hz}$  e  $\Gamma = 2$  (Hunt *et al.*, 1999).

Não se encontrou, na literatura, nenhum relato sobre a obtenção, através de simulações computacionais, de perfis de escoamento como o da Figura 6.6.3. Todavia, isto pode ser feito através da formulação do DEM implementada neste trabalho. No

artigo de Hunt *et al.* (1999), não há informações sobre o diâmetro (ou diâmetros) das partículas utilizadas nos experimentos cujas fotografias são mostradas nas Figuras 6.6.2 e 6.6.3. De qualquer modo, consideram-se, no presente trabalho, apenas partículas com  $2,0 \times 10^{-3}$  m de diâmetro. Admitindo-se que a densidade partículas era de 2500 kg/m<sup>3</sup>, estima-se que seriam necessárias cerca de 114592 delas, com tal diâmetro, para perfazer os mencionados 1,2 kg de material empregados em cada experimento. Assim sendo, conclui-se que a reprodução das dimensões do recipiente utilizado seria inviável, uma vez que isto exigiria demasiados esforço e tempo computacionais. Então, exceto para a largura do orifício ( $L_o = 0,0175$  m) e para o ângulo de inclinação ( $\theta_{inc} = 45^\circ$ ), adotam-se dimensões menores que aquelas, que são  $L = 0,1975$  m,  $H = 0,15$  m,  $h = 0,09$  m e  $M = 2,0 \times 10^{-3}$  m. Tal como nos casos antecedentes, a obtenção da configuração inicial é efetuada por deposição em um recipiente com orifício fechado. Neste caso, porém, substituem-se as Equações (6.3.1) a (6.3.3) por

$$\mathbf{r}_i = \begin{bmatrix} (1 - 2 \text{rand})(M - d_i)/2 \\ (1 - 2 \text{rand})(L - d_i)/2 \\ (H + h - d_i)/2 \end{bmatrix}, \quad (6.6.1)$$

onde se admite que o ponto central do recipiente, no instante inicial do processo de descarga, se situa na origem do espaço cartesiano.

Observe-se que a profundidade adotada para o recipiente ( $M$ ) é igual ao diâmetro das partículas. Deste modo, nota-se que o sistema a ser simulado é bidimensional, já que o movimento das partículas fica restrito às direções y e z. Vale ressaltar que, na maioria dos trabalhos que envolvem simulações com o DEM e são citados nesta tese, a modelagem adotada é bidimensional. Em geral, o intuito de tal simplificação é economizar esforço computacional, já que o número de partículas requerido em uma dada simulação em duas dimensões é significativamente menor que o necessário para o estudo de um sistema tridimensional equivalente. Além disto, mesmo que se empregue a mesma quantidade de partículas, o número médio de vizinhos por partícula em um sistema bidimensional é inferior ao de um tridimensional, de modo que

um menor esforço de cálculo é exigido a cada passo de integração. No exemplo em questão, 7000 partículas constituem um número adequado para preencher o recipiente a ser simulado. Após a deposição das partículas, efetua-se a divisão do leito em faixas alternadas, conforme a metodologia descrita na página 169, mas com apenas 350 partículas em cada camada. A partir da configuração inicial gerada, realiza-se, primeiramente, a simulação de um processo de descarga com as paredes do recipiente imóveis. Expõem-se, na Figura 6.6.4, algumas configurações obtidas ao longo da simulação. Como se pode notar, o padrão de escoamento obtido difere em grande medida daquele observado experimentalmente (*Cf.* Figura 6.6.2), pois se verifica um aspecto bastante irregular, com partículas se movendo em grandes blocos. As partículas situadas na região central do leito (acima do orifício) se movem mais rapidamente que as outras. Entretanto, parece haver um fluxo mais intenso de partículas nas proximidades das paredes laterais que nas regiões intermediárias entre as paredes e o centro, o que não condiz com um típico escoamento afunilado, tal como obtido nos experimentos de Hunt *et al.* (1999). A variação do formato da superfície superior do leito durante a descarga também se mostra irregular, como consequência do perfil de velocidades das partículas.

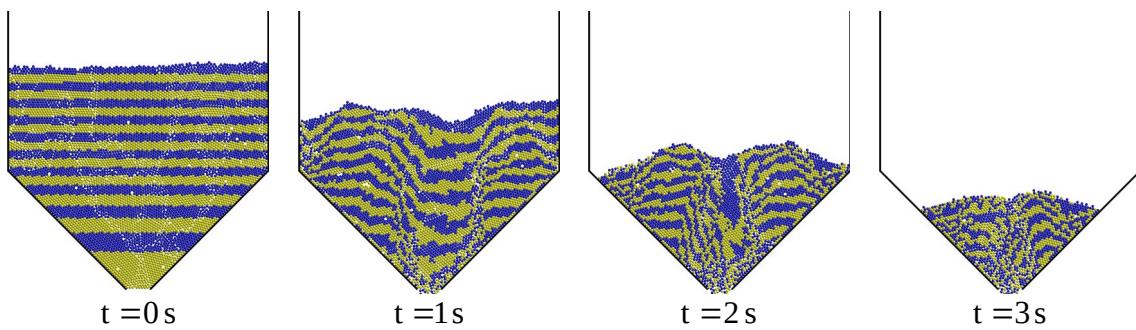


Figura 6.6.4 – Simulação bidimensional da descarga de partículas a partir de um recipiente plano imóvel.

Mesmo com o resultado da simulação da descarga com o recipiente imóvel não se enquadrando às observações experimentais, convém realizar uma simulação com vibrações horizontais, de modo a se comparar com o perfil mostrado na Figura 6.6.3. Para isto, utiliza-se a mesma configuração inicial do caso anterior. Durante a simulação, entretanto, faz-se com que as paredes se movimentem de forma senoidal na direção  $y$  (vide Figura 6.6.1). Assim, considerando-se que a posição inicial de uma determinada

parede “k” é  $r_k^{(0)}$  e que ela se movimenta, ao longo do processo, como amplitude  $A_{vib}$  e freqüência  $f_{vib}$ , tem-se a posição de cada parede, em função do tempo, dada por

$$\mathbf{r}'_k(t) = \mathbf{r}_k^{(0)} + A_{vib} \begin{bmatrix} 0 \\ \sin(2\pi f_{vib} t) \\ 0 \end{bmatrix} \quad \forall k = 1, \dots, N_{ob}. \quad (6.6.2)$$

Para se ter a velocidade de uma parede “k” ( $\mathbf{v}'_k$ ), em função do tempo, basta derivar a função  $\mathbf{r}'_k(t)$ . Visando-se poder comparar o resultado com aquele mostrado na Figura 6.6.3, a simulação é realizada com  $f_{vib} = 20$  Hz e  $\Gamma = 2$ , o que corresponde a uma amplitude de vibração de  $1,2412 \times 10^{-3}$  m. Neste caso, a relação  $A_{vib}/d$  é igual a 0,6206. Apresentam-se, na Figura 6.6.5, algumas configurações obtidas durante a simulação. Como se percebe, o perfil alcançado, principalmente devido à sua irregularidade, não se assemelha ao escoamento afunilado invertido resultante do experimento de Hunt *et al.* (1999). De fato, parece que as vibrações não exercem grande efeito sobre o padrão de escoamento. Assim como no caso da simulação com recipiente estático, o fluxo de partículas se dá em grandes blocos. Portanto, conclui-se que as simulações realizadas não representam adequadamente o comportamento experimental observado pelos referidos autores.

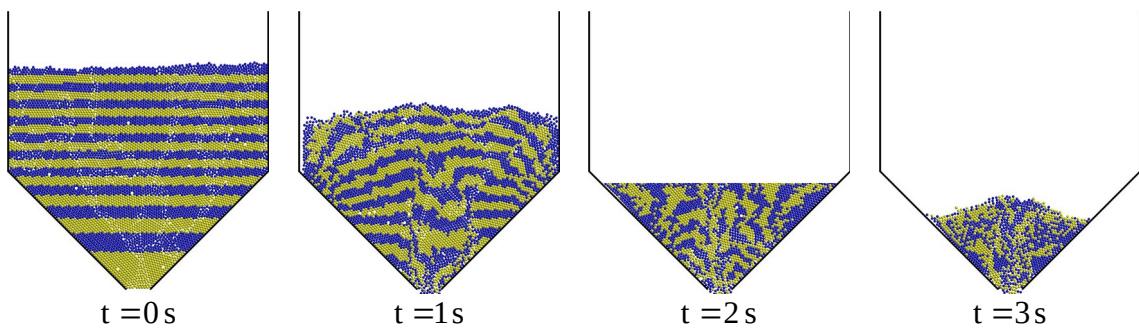


Figura 6.6.5 – Simulação bidimensional da descarga de partículas a partir de um recipiente plano sob vibração horizontal com  $f_{vib} = 20$  Hz e  $\Gamma = 2$ .

Conjetura-se que o escoamento irregular obtido nas simulações, que tem como atributo o movimento em bloco de partículas, decorre do arranjo característico de leitos monodispersos bidimensionais, que em muito se distinguem dos seus análogos com três

dimensões, como se pode constatar no livro de Bideau e Hansen (1993), por exemplo. No caso de leitos bidimensionais, mesmo se forem obtidos por deposição aleatória, as partículas tendem a se organizar, de modo espontâneo, em uma estrutura cristalina hexagonal, o que é favorecido no exemplo em questão pela presença de paredes rígidas e lisas. Na configuração inicial utilizada nas simulações, observa-se esta tendência, pois o leito se organiza em blocos internamente ordenados, com ocasionais lacunas, separados por falhas na estrutura cristalina. Durante o processo de descarga, ocorre uma contínua reestruturação do leito, mas sempre se mantendo uma organização em blocos.

No caso tridimensional, tal como recorrentemente mencionado nesta tese, leitos formados por deposição aleatória apresentam ordenação estrutural nas proximidades de paredes, mas exibem disposições totalmente desordenadas em regiões mais afastadas. Diante disto, espera-se que os escoamentos gravitacionais de leitos bi e tridimensionais sejam bastante distintos. Convém, então, se buscar uma maneira de tornar viável uma simulação em três dimensões do sistema estudado por Hunt *et al.* (1999). Uma possível medida seria aumentar a escala do sistema, de modo a se poder aplicar maiores passos de tempo na integração das equações do movimento. Então, admitem-se partículas com diâmetro de 0,01 m, ou seja, cinco vezes maiores que aquelas empregadas nas simulações bidimensionais. As dimensões do novo recipiente são  $L = 0,55\text{ m}$ ,  $H = 0,40\text{ m}$ ,  $h = 0,25\text{ m}$ ,  $L_o = 0,05\text{ m}$  e  $M = 0,04\text{ m}$ , de modo que o ângulo de inclinação ( $\theta_{inc}$ ) é também igual a  $45^\circ$ . Como se nota, a profundidade do recipiente é de apenas quatro vezes o diâmetro das partículas. Todavia, visando-se obter, efetivamente, as características de um leito tridimensional, admitem-se condições de contorno periódicas na direção x (Cf. Figura 6.6.1), no lugar de paredes rígidas na frente e atrás. Dado isto, verifica-se que 9740 partículas são suficientes para preencher de forma apropriada o recipiente simulado. Mais uma vez, a configuração inicial é obtida por deposição em um recipiente fechado, com as partículas sendo inseridas no sistema em posições dadas pela Equação (6.6.1). Em seguida, definem-se camadas alternadas com 974 partículas, cada uma. Então, inicia-se uma simulação com o recipiente mantido imóvel, cujo resultado pode ser visto na Figura 6.6.6. Desta vez, têm-se um fluxo com maior regularidade que no caso bidimensional, e que se assemelha ao escoamento afunilado experimentalmente observado, representado na Figura 6.6.2. Como se nota

através das deformações das faixas alternadas, as partículas localizadas na região central fluem mais velozmente que aquelas próximas às paredes laterais. Entretanto, diferentemente do aspecto experimental, há um fluxo expressivo em tais regiões laterais, evidenciado pelo descenso das camadas, de modo que não se verifica uma inclinação semelhante à experimental na superfície superior do leito. Atribui-se esta característica a uma subestimação das forças de atrito entre as partículas e as paredes, seja devido aos modelos utilizados ou aos valores adotados para os seus parâmetros. Com isto, há um excessivo deslizamento das partículas em contato com as paredes inclinadas a  $45^\circ$ , o que dá origem ao observado fluxo lateral.

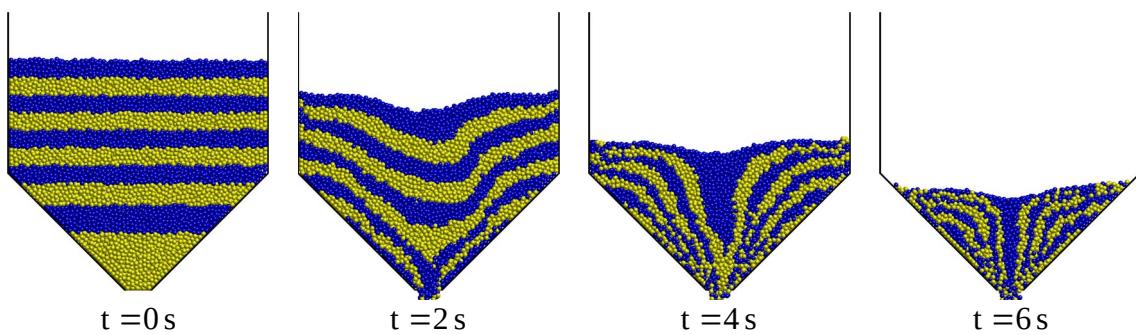


Figura 6.6.6 – Simulação tridimensional da descarga de partículas a partir de um recipiente plano imóvel.

Uma segunda simulação é realizada a partir da mesma configuração inicial mostrada na Figura 6.6.6. Porém, nela se realizam vibrações horizontais através da predeterminação do movimento das paredes, segundo a Equação (6.6.2). A freqüência de vibração é mantida em 20 Hz, como nos casos experimental e bidimensional. Entretanto, devido ao aumento de escala, opta-se por variar a aceleração relativa e manter a mesma relação  $A_{vib}/d$ , que é de 0,6206. Assim, adota-se uma amplitude de  $6,206 \times 10^{-3}$  m, da qual resulta uma aceleração relativa igual a 10. Pode-se apreciar, na Figura 6.6.7, o resultado desta segunda simulação tridimensional. Neste caso, obtém-se perfis de escoamento distintos nas partes inferior e superior do leito. Na parte inferior, mais próxima ao orifício, nota-se um escoamento afunilado típico, com as partículas fluindo mais intensamente na região central. Já na parte superior, principalmente acima das paredes inclinadas, nota-se a inversão no padrão de escoamento, tal como foi observado experimentalmente por Hunt e colaboradores

(1999), uma vez que as partículas situadas nas regiões laterais possuem maior velocidade.

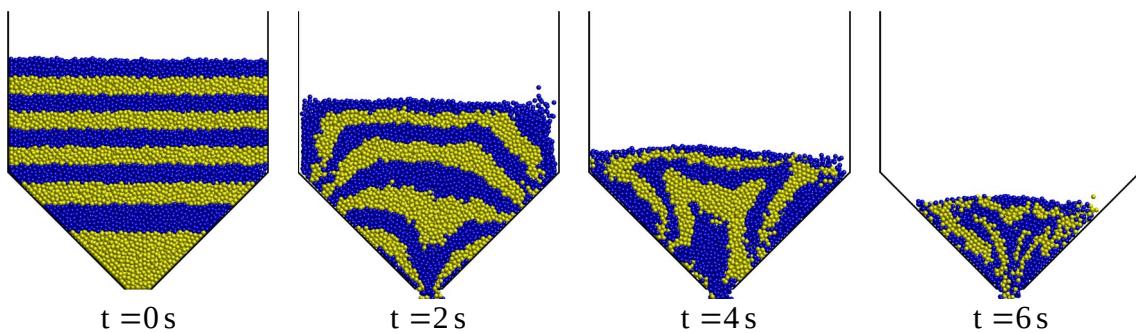


Figura 6.6.7 – Simulação bidimensional da descarga de partículas a partir de um recipiente plano sob vibração horizontal com  $f_{\text{vib}} = 20 \text{ Hz}$  e  $\Gamma = 10$ .

A partir das simulações nas quais se aplica uma modelagem tridimensional do sistema, evidencia-se, portanto, uma grande mudança no perfil de velocidades das partículas provocada pela submissão do sistema a vibrações mecânicas horizontais, tal como se demonstrou no referido trabalho experimental. Os perfis obtidos por simulação não são idênticos aos correspondentes perfis reais, mas em muito se assemelham a eles. Provavelmente, os motivos da discrepância estão relacionados aos modelos de força utilizados, que são simplificados, e aos valores dos seus parâmetros. Outras causas devem ser a mudança de escala e as diferenças nas proporções entre as dimensões do recipiente simulado e das partículas. Em relação às taxas de descarga, observa-se que são praticamente constantes, tanto para o recipiente imóvel quanto para o vibrante, com valores de 1175,7 e 1256,1 partículas por segundo, respectivamente. Portanto, as vibrações horizontais promovem um aumento de aproximadamente 6,8 % na taxa de descarga, o que condiz com os resultados relatados por Hunt *et al.* (1999).

Por fim, resta afirmar que os resultados desta seção demonstram a importância da modelagem tridimensional no estudo de certas características de sistemas granulares através do DEM. Como se mencionou anteriormente, modelagens em duas dimensões são empregadas em grande parte dos trabalhos realizados com o auxílio de tal técnica, com fins de economia de esforço computacional. Evidencia-se, entretanto, que o uso deste artifício exige cautela.